



## Posudek školitele na diplomovou práci Miroslava Rubeše „**Intermolecular Interactions in Fullerene Solids**“

Předkládaná diplomová práce se zabývá studiem orientační dynamiky v pevných fulerenech s důrazem na fyzikálně korektní popis disperzních interakcí. Disperzní (Londonovy) síly působící ve slabě vázaných molekulových komplexech jsou v současné době intenzivně studovány nejen v souvislosti s uhlíkovými nanomateriály, ale jsou důležité například i pro většinu biologicky relevantních systémů. Je nutné zdůraznit, že přes značné úsilí věnované tomuto problému se dosud nepodařilo plně zvládnout přesné a fyzikálně podložené výpočty disperzních interakcí pro systémy s větším počtem atomů. Vzhledem k významu uvedené problematiky je jistě velmi žádoucí provést důkladnou analýzu spolehlivosti běžně používaných teoretických přístupů na strukturně jednoduchých systémech, jako jsou již zmíněné pevné fulereny. Z tohoto hlediska je posuzovaná diplomová práce nesporným přínosem, neboť obsahuje detailní srovnání nejpřesnějších teoretických metod, které jsou aplikovatelné na velké systémy: DFT a post-HF (MP2) ab initio metody.

Po celou dobu řešení (více než dva roky) Miroslav Rubeš prokázal schopnost samostatně a tvořivě pracovat na zadaném tématu a během této doby zvládl široké spektrum kvantově-chemických metod od DFT výpočtů v pevné fázi až po vysoce přesné výpočty klastrových modelů pevných fulerenů. Některé výpočetní metody (např. DFT výpočty s použitím pseudo-atomových orbitalů) zavedl v naší skupině vůbec poprvé. Kromě práce na vlastním projektu je třeba ocenit i jeho zapojení do dalších témat (interakce malých molekul s vysokosilikátovými zeolity, vývoj NLC-DFT metody pro studium disperzních interakcí v grafitických nanostrukturách). Z výše uvedeného je zcela zřejmé, že Miroslav Rubeš má velmi dobré předpoklady pro další vědeckou práci.

Posuzovaná diplomová práce obsahuje celou řadu nových a dle mého soudu závažných poznatků. Výpočty Møller-Plesset metodou jsou, pokud je mi známo, prvním post-HF

výpočtem na pevných fullerenech. Tento výsledek je třeba posuzovat s ohledem na známé obtíže DFT přístupů pro slabě vázané molekulové komplexy. Dalším významným (i když ne zcela neočekávaným) výsledkem je kvalita DFT-D popisu pevných fullerenu. Domnívám se, že kombinace obou metod použitá v této práci představuje momentálně nej přesnější a zároveň nejspolehlivější teoretický přístup pro výpočet fyzikálních charakteristik grafických systémů. Výsledky diplomové práce budou shrnuty do dvou publikací, první z nich je již zaslána do tisku (PCCP) a druhá je ve fázi sepsování. Většina výsledků této práce byla také prezentována na mezinárodní konferenci NT05 (26.6.-1.7. 2005, Gothenburg, Sweden).

Závěrem chci s potěšením konstatovat, že podle mého názoru je diplomová práce M. Rubeše na velmi vysoké formální i odborné úrovni a bezvýhradně ji doporučuji k obhajobě.

V Praze 16. května 2006



RNDr. Ota Bludský, CSc.